

П. В. Захаров^{1*}, А. М. Ерёмин¹, М. Д. Старостенков²

¹ Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет имени В. М. Шукшина, г. Бийск

² Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, г. Барнаул

* zakharovpvl@rambler.ru

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ НА СВОБОДНОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА Pt_3Al

Методом молекулярной динамики изучено влияние свободной цилиндрической поверхности кристалла Pt_3Al на характеристики дискретного бризера с мягким типом нелинейности. Проведена сравнительная характеристика свойств бризера в объеме кристалла и вблизи поверхности. Получены энергетические характеристики бризеров.

Ключевые слова: дискретный бризер, квази-бризер, молекулярная динамика, lammps, нелинейная динамика, солитон.

P. V. Zakharov, A. M. Eremin, M. D. Starostenkov

DISCRETE BREATHERS ON A FREE CYLINDRICAL SURFACE OF Pt_3Al CRYSTAL

The influence of the free cylindrical surface of the Pt_3Al crystal on the characteristics of a discrete breather with a soft type of nonlinearity is studied by the molecular dynamics method. A comparative characteristic of the properties of the breather in the volume of the crystal and near the surface is given. The energy characteristics of the breathers have been obtained.

Keywords: discrete breather, quasi-breather, molecular dynamics, lammps, nonlinear dynamics, soliton.

Введение

Дискретные бризеры (ДБ) – локализованные в пространстве и периодические по времени высокоамплитудные возбуждения в нелинейных дискретных структурах с трансляционной симметрией [1]. Существуют экспериментальные свидетельства возникновения таких локализованных возбуждений в различных физических системах, включая решетки спинов в антиферромагнетиках [2], решетки связанных нелинейных оптических волноводов [3], ансамбли микромеханических осцилляторов. Применение подобных систем в качестве элементной базы перспективных радиочастотных фильтров, магнетометров и других устройств обуславливает не только фундаментальный, но и прикладной интерес к бризерам.

Дискретные бризеры можно разделить на два типа по характеру зависимости их частоты от амплитуды [4]. У дискретных бризеров мягкого типа частота уменьшается с увеличением его амплитуды (такие дискретные бризеры могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре: их частота лежит в щели фононного спектра и поэтому их называют щелевыми), а у дискретных бризеров жесткого типа происходит обратное (они могут иметь частоты, как в щели, так и выше фононного спектра). Дискретные бризеры с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, например, в NaCl , Pt_3Al [5–6], а также в графене и графене. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в чистых металлах с ГЦК-, ОЦК-, ГПУ-структурах. При рассматривании ДБ в различных кристаллах чаще всего речь идет об их свойствах в «идеальных» решетках, без каких либо дефектов структуры. Однако очевидным является и тот факт, что дефекты и различные неоднородности среды оказывают влияние на характеристики таких объектов. В последние несколько лет появился ряд работ, где изучаются взаимодействия ДБ с точечными дефектами в кристаллах [7–8].

В данной работе предпринята попытка исследования дискретных бризеров с мягким типом нелинейности вблизи цилиндрической поверхности кристалла стехиометрического состава A_3B , на примере Pt_3Al . Как показано в наших предыдущих работах в данном кристалле возможно существование дискретных бризеров, при этом ДБ с мягким типом нелинейности могут возбуждаться спонтанно при высоких температурах, либо при периодическом воздействии на кристалл с частотами, близкими к частотам ДБ, кроме этого показано [8] возможность возбуждения таких объектов потоком высокоэнергетических частиц. Тем самым исследование ДБ вблизи различных форм поверхностей видится актуальным и полезным при поиске их в реальных экспериментах.

Модель и методика эксперимента, а также основные результаты

Моделирование проводилось с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS [9]. Рассматриваемая модель представляла собой объемный ГЦК кристалл Pt_3Al (рис. 1). Количество частиц в рассматриваемой модели 102624.

Для моделирования межатомного взаимодействия использовался потенциал полученный методом погруженного атома (ЕАМ). В вычислительной химии модель погружённого атома используется для приближенного описания энергии взаимодействия между двумя атомами. ЕАМ потенциал генерировался для данного сплава с использованием программного обеспечения предложенного Zhou [10]. Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи является важным этапом при моделировании. Полная энергия E кристалла может быть выражена как

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

где φ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j отделенными друг от друга расстоянием r_{ij} , а F_i энергия вложения связанная с вложенным атомом i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Электронная плотность можно рассчитать по формуле $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$, где $f_j(r_{ij})$ - электронная плотность на участке атома i находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j .

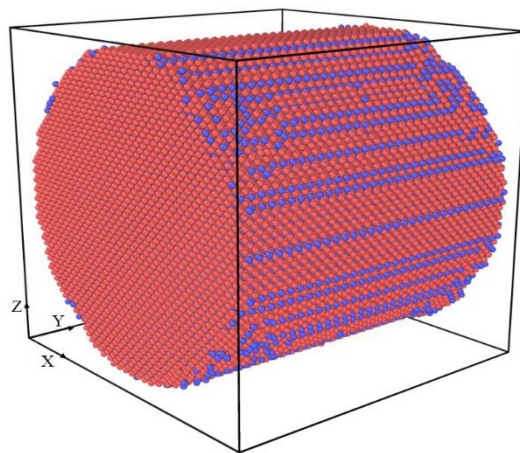


Рис. 1. Объемный вид цилиндрического кристалла Pt_3Al , содержащего 102624 частиц, ось X ориентирована вдоль кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$, $Y - \langle 010 \rangle$, $Z - \langle 001 \rangle$

Потенциалы, применяемые в этой модели, хорошо подогнаны к основным свойствам материалов, таким как постоянные решетки, упругие постоянные, объемные модули, энергии образования вакансий и энергии сублимации, и они дают достаточно хорошие решения [10].

Процесс подготовки модели состоял из первоначальной релаксации кристалла со свободными граничными условиями вдоль всех осей при температурах 500 К с последующим охлаждением до 0 К, что позволяло исключить влияние тепловых колебаний на бризеры в кристалле.

При отклонении атома Al на рис. 2а вдоль вертикальной оси Z он через несколько пс передает свою энергию атому под ним и затухает сам.

При возбуждении этого же атома Al вдоль горизонтальной оси X он через несколько пс передает свою энергию соседним атомам и затухает сам, энергия рассеивается, ДБ не появляются. При отклонении атома на рис.2б вдоль вертикальной оси Z он порождает ДБ.

При отклонении атома на рис. 2б вдоль вертикальной оси Z он порождает ДБ.

При возбуждении этого же атома вдоль горизонтальной оси X он через несколько пс начинает колебаться по диагонали XZ – порождает ДБ.

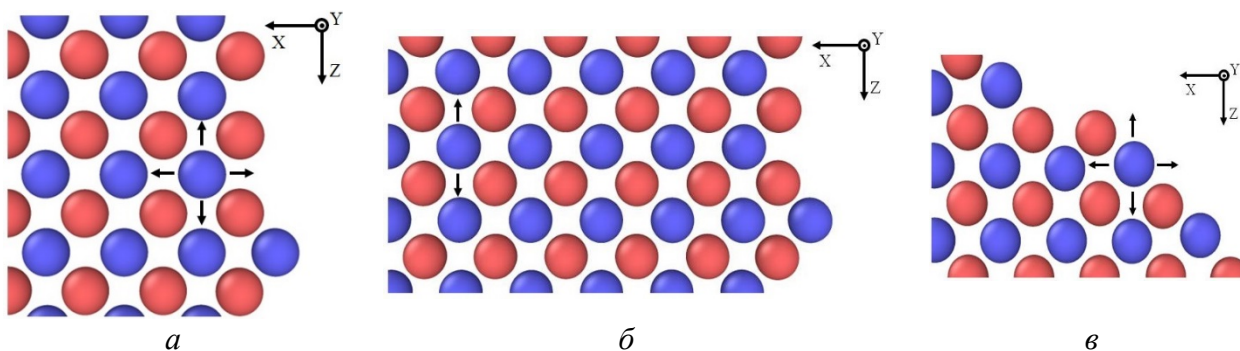


Рис. 2. Направления отклонения атом Al из стационарного положения

При отклонении атома 1 на рис. 3а вдоль вертикальной оси Z он через несколько пс передает свою энергию соседним атомам и затухает сам.

При возбуждении этого же атома вдоль горизонтальной оси X он через несколько пс передает свою энергию атому 2 и затухает сам, атом 2 начинает колебаться по диагонали XZ – порождает ДБ. Расположенный в симметричной относительно горизонтальной оси четверти атом 1 также возбуждает ДБ из атома 2. При отклонении атомов на рис. 3б и рис. 3с вдоль вертикальной оси Z и вдоль горизонтальной оси X , эти атомы затухают. Все атомы Al отклонялись на $0,75 \text{ \AA}$.

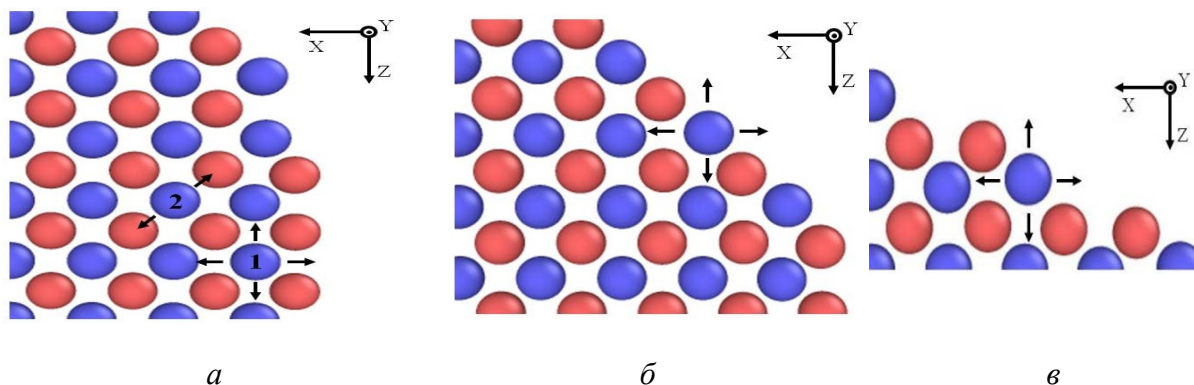


Рис. 3. Направления отклонения атом Al из стационарного положения

Обсудим возможность возбуждения дискретного бризера непосредственно на цилиндрической поверхности кристалла. В результате релаксации и наличия свободных граничных условий верхний слой атомов несколько деформируется и атомы тяжелой подрешетки смещаются вглубь, а атомы легкой наоборот выпирают наружу. Все это приводит к нарушению симметрии и, как оказалось, существенно влияет на возможность колебаний квази-бризера вдоль поверхности кристалла. Получить долгоживущую моду вдоль поверхности не удалось. Колебания оказывались не устойчивыми и достаточно быстро колебательная энергия рассеивалась, ввиду расфокусировки колебаний. Попытки возбудить ДБ,

направление колебания которого поляризованы перпендикулярно поверхности, оказались более успешны. Полученная мода оказалась долгоживущей, по крайней мере, более 1000 периодов колебаний.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Проект № 16-12-10175).

ЛИТЕРАТУРА

1. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array / M. Sato [et al.] // Physical Review Letters. 2003. V. 90, № 4. P. 044102.
2. Wave motions along lattices with nonlinear on-site and inter-site potentials. cooperation and/or competition leading to lattice solitons and/or discrete breathers / M. G. Velarde [et al.] // Proceedings of the Estonian Academy of Sciences. 2015. T. 64. № 3. С. 396–404.
3. Долгов А. С. Локализация колебаний в нелинейной кристаллической структуре / А. С. Долгов // Физика твердого тела. 1986. Т. 28. № 6. С. 1641.
4. Chechin G. M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // Physical Review E. 2006. 74. P. 036608.
5. Динамика дискретных бризеров в кристалле / М. Д. Старостенков [и др.] // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58, № 9. С. 136–140.
6. Квази-бризерные состояния в кристалле A_3B при наличии точечных дефектов / П. В. Захаров [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12, № 2. С. 146–152.
7. Захаров П. В. Дискретные бризеры в кристалле CuAu / П. В. Захаров [и др.] // Письма о материалах. 2016. № 6(4). С. 29–299.
8. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A_3B потоком частиц / П. В. Захаров [и др.] // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. № 2. С. 217–222.
9. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]: Официальный сайт. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата посещения: 04.08.2017).
10. Zhou X. W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe / NiFe multilayers / X. W. Zhou, R. A. Johnson, H. N. G. Wadley // Physical Review B. 2004. 69. P. 144113.